

Docket No. 21.1837

IN THE UNITED STATES PATENT AND TRADEMARK OFFICE

RS  
# 4

In re Application of:

Munetaka TAKEUCHI et al.

Serial No.: To Be Assigned

Filed: July 8, 1997

For: APPARATUS AND METHOD FOR SIMULATING PHENOMENA OF A PARTICLE  
FORMED OF SUBSTRATE PARTICLES AND ADSORBATE PARTICLES

**SUBMISSION OF CERTIFIED COPY OF PRIOR FOREIGN**  
**APPLICATION IN ACCORDANCE**  
**WITH THE REQUIREMENTS OF 37 C.F.R. §1.55**

Honorable Commissioner of Patents and Trademarks  
Washington, D.C. 20231

Sir:

In accordance with the provisions of 37 C.F.R. §1.55, Applicants submit herewith a  
certified copy of the following foreign application:

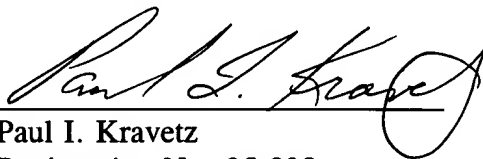
Japanese Patent Application No. 08-339624, filed December 19, 1996

It is respectfully requested that Applicants be given the benefit of the foreign filing date  
as evidenced by the certified paper attached hereto, in accordance with the requirements of 35  
U.S.C. §119.

Respectfully submitted,

STAAS & HALSEY

By:



Paul I. Kravetz

Registration No. 35,230

STAAS & HALSEY  
700 Eleventh Street, N.W.  
Suite 500  
Washington, D.C. 20001  
(202) 434-1500

Date: July 8, 1997

日 本 国 特 許 庁  
PATENT OFFICE  
JAPANESE GOVERNMENT

別紙添付の書類に記載されている事項は下記の出願書類に記載されて  
る事項と同一であることを証明する。

This is to certify that the annexed is a true copy of the following application as filed  
in this Office.

出 願 年 月 日  
Date of Application:

1 9 9 6 年 1 2 月 1 9 日

願 番 号  
Application Number:

平成 8 年特許願第 3 3 9 6 2 4 号

願 人  
Applicant (s):

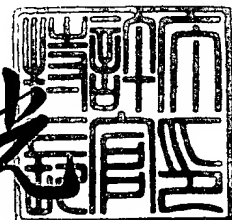
富士通株式会社

CERTIFIED COPY OF  
PRIORITY DOCUMENT

1 9 9 7 年 4 月 2 5 日

特 許 庁 長 官  
Commissioner,  
Patent Office

荒井 寿光



【書類名】 特許願

【整理番号】 9607127

【提出日】 平成 8年12月19日

【あて先】 特許庁長官殿

【国際特許分類】 G06F 17/00

【発明の名称】 粒子シミュレーションシステム

【請求項の数】 13

【発明者】

    【住所又は居所】 神奈川県川崎市中原区上小田中4丁目1番1号 富士通株式会社内

    【氏名】 竹内 宗孝

【発明者】

    【住所又は居所】 神奈川県川崎市中原区上小田中4丁目1番1号 富士通株式会社内

    【氏名】 紙谷 希

【発明者】

    【住所又は居所】 青森県青森市大字野木字山口245番9（番地なし）株式会社富士通青森システムエンジニアリング内

    【氏名】 林 広海

【発明者】

    【住所又は居所】 青森県青森市大字野木字山口245番9（番地なし）株式会社富士通青森システムエンジニアリング内

    【氏名】 石戸橋 眞

【特許出願人】

    【識別番号】 000005223

    【氏名又は名称】 富士通株式会社

    【代表者】 関澤 義

【代理人】

    【識別番号】 100072590

【弁理士】

【氏名又は名称】 井桁 貞一

【電話番号】 044-754-3035

【手数料の表示】

【予納台帳番号】 011280

【納付金額】 21,000円

【提出物件の目録】

【物件名】 明細書 1

【物件名】 図面 1

【物件名】 要約書 1

【包括委任状番号】 9001093

【プルーフの要否】 要

【書類名】 明細書

【発明の名称】 粒子シミュレーションシステム

【特許請求の範囲】

【請求項1】

少なくとも第1の粒子群と第2の粒子群とから構成される粒子の運動の計算処理を行い、当該粒子における現象をシミュレートする粒子シミュレーションシステムにおいて、

前記第1の粒子群の粒子の発生条件として、複数の発生期間と粒子の量に関する情報を画面上で操作者に指定させて設定する運動条件設定手段と、

前記運動条件設定手段で設定された第1の粒子群中の粒子の発生期間および粒子の量に関する情報に基づいて、シミュレーション中の指定された期間に、前記設定された粒子の量を発生させて粒子の運動の計算処理を行う分子運動計算手段とを備えたことを特徴とする粒子シミュレーションシステム。

【請求項2】

前記運動条件設定手段は複数種類の粒子について設定を行うことを特徴とする請求項1記載の粒子シミュレーションシステム。

【請求項3】

前記運動条件設定手段は、第1の粒子群中の粒子を構成する原子にランダムに初速度を与えるか、粒子の重心の並進運動にのみ初速度を与えて、粒子を構成する原子に該重心に対して静止させるかを、画面上で操作者に指定させて設定を行うことを特徴とする請求項1記載の粒子シミュレーションシステム。

【請求項4】

前記運動条件設定手段で、第1の粒子群中の粒子の重心の並進運動にのみ初速度を与えて粒子を構成する原子に該重心に対して静止させる選択がされた場合に、当該粒子の向きを、画面上での指定により設定を行うことを特徴とする請求項1記載の粒子シミュレーションシステム。

【請求項5】

第1の粒子群と第2の粒子群とから構成される粒子の運動の計算処理を行い、当該粒子における現象をシミュレートする粒子シミュレーションシステムにおい

て、

前記第1の粒子群の粒子の発生位置を領域として、画面上で操作者に指定させて設定する運動条件設定手段と、

前記運動条件設定手段で設定された領域より、第1の粒子群の粒子の発生させて、粒子の運動の計算処理を行う分子運動計算手段とを備えたことを特徴とする粒子シミュレーションシステム。

【請求項6】

粒子の運動の計算処理を行い、当該粒子における現象をシミュレートする粒子シミュレーションシステムにおいて、

粒子の運動の計算処理を行う分子運動計算手段に入力される粒子の運動条件を、画面を通して操作者に指定させて設定する運動条件設定手段と、

前記運動条件設定手段で設定した条件に基づいて、粒子の運動の初期状態を示す図を画面に表示する初期運動状態図表示手段とを備えたことを特徴とする粒子シミュレーションシステム。

【請求項7】

前記運動条件設定手段の表示と、初期運動状態図表示手段の表示が同一画面上であることを特徴とする請求項6記載の粒子シミュレーションシステム。

【請求項8】

前記シミュレーションの対象の粒子が、第1の粒子群と第2の粒子群とから構成され、前記運動条件設定手段は、前記第2の粒子群に向かって運動する第1の粒子群の初期の位置を領域として設定し、前記初期運動状態図表示手段は、設定された第1の粒子群が位置する領域と第2の粒子群が位置する領域との関連を示す図を表示することを特徴とする請求項6記載の粒子シミュレーションシステム。

【請求項9】

前記シミュレーションの対象の粒子が、第1の粒子群と第2の粒子群とから構成され、前記運動条件設定手段は、前記第2の粒子群に向かって運動する第1の粒子群の粒子に初速度を与える方向を設定し、前記初期運動状態図表示手段は、前記運動条件設定手段で設定した運動方向に基づいて、第1の粒子群が位置する

領域と第2の粒子群が位置する領域と第1の粒子群の運動方向との関連を示す図を表示することを特徴とする請求項6記載の粒子シミュレーションシステム。

【請求項10】

前記シミュレーションの対象の粒子が、第1の粒子群と第2の粒子群とから構成され、かつ、前記第1の粒子群は第2の粒子群に対して運動するものであり、前記運動条件設定手段は、前記第2の粒子群について、操作者の範囲指定に基づいて、複数個の属性を設定し、

前記初期運動状態図表示手段は、設定された複数個の属性を識別可能な態様の図を表示することを特徴とする請求項6記載の粒子シミュレーションシステム。

【請求項11】

コンピュータを動作させて、

第1の粒子群と第2の粒子群とから構成される粒子の運動をシミュレーションするために、前記第1の粒子群の粒子の発生条件として、複数個の発生期間と粒子の量に関する情報を画面上で操作者に選択させて設定する運動条件設定手段と

前記運動条件設定手段で設定された第1の粒子群中の粒子の発生期間および粒子の量に関する情報に基づいて、シミュレーション中の指定された期間に、前記設定された粒子の量を発生させて粒子の運動の計算処理を行う分子運動計算手段とを機能させるプログラムを格納した記憶媒体。

【請求項12】

コンピュータを動作させて、

第1の粒子群と第2の粒子群とから構成される粒子の運動をシミュレーションするために、前記第1の粒子群の粒子の発生位置を領域として、画面上で操作者に指定させて設定する運動条件設定手段と、

前記運動条件設定手段で設定された領域より、第1の粒子群の粒子の発生させて、粒子の運動の計算処理を行う分子運動計算手段とを機能させるプログラムを格納した記憶媒体。

【請求項13】

コンピュータを動作させて、

粒子の運動の計算処理を行い当該粒子における現象をシミュレートする分子運動計算手段に入力される粒子の運動条件を、画面を通して操作者に設定させる、運動条件設定手段と、

前記運動条件設定手段で設定した条件に基づいて、粒子の運動の初期状態を示す図を画面に表示する初期運動状態図表示手段とを機能させるプログラムを格納した記憶媒体。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】

本発明は、粒子（原子、分子、または、原子、分子より構成されるもの）の運動を分子動力学計算を行うことで、粒子の現象をシミュレーションするものに関する。新素材の開発において、成膜過程やプロセス条件、そして表面構造の詳細を知るには、走査型トンネル電子顕微鏡（STM）、原子間力顕微鏡（AFM）等の実験的手段があるが、これだけでは不十分であり、どのような過程を経て最終的な現象が起きたかを見るためには、原子、分子レベルでその現象（結晶の成長、表面吸着、表面損傷等）をシミュレーションする必要がある。

【0002】

【従来の技術】

従来、原子、分子レベルで結晶の成長、表面吸着、表面損傷等の現象を、分子動力学的手法でシミュレーションすることは行われていたが、分子動力学計算を行うプログラムに入力するデータ（どのような粒子がどのような属性を持っているかなど）が、個々のシミュレーション対象毎で異なり、さらに、分子のデータは膨大であるために、それを手作業で作成するのは極めて困難であった。そこで、研究者は自分のシミュレーションの対象毎に、分子データを作成するプログラムを開発していたが、その開発に多くの時間を要していた。また、シミュレーションする対象が異なると、分子データを作成するプログラムを再作成しなければならなかった。

【0003】

【発明が解決しようとしている課題】

吸着、結晶成長、表面損傷など様々な現象を扱えるように、より汎用的なシミュレーションシステムを開発することが望まれている。すなわち、複数の原子、分子、粒子を対象とし、さらに、多くのシミュレーションの状態（初期状態）をカバーし、操作性が統一できるようなプログラム上のモデルを考慮する必要がある。汎用的なモデルについては、粒子の運動自体（こういったタイミング粒子が動き出すか）と、粒子の初期位置（どこから粒子が動き出すか）とについて考慮する必要がある。

#### 【0004】

また、いくら汎用的なモデルを考案したとしても、個々のシミュレーションの対象に合致するようにするためには、分子動力学計算を行うプログラムに様々な設定値（パラメタ）を入力する必要がある。しかし、操作者はパラメタの意味を十分理解している必要があり、例え、理解していたとしても、シミュレーション対象における、変更したパラメタ値の変更の大きさが理解しにくいという問題がある。

#### 【0005】

##### 【課題を解決するための手段】

上記の粒子の運動自体の設定をより汎用的にするという課題については、第1の粒子群と第2の粒子群とから構成される粒子の運動をシミュレーションするために、前記第1の粒子群の粒子の発生条件として、複数個の発生期間と粒子の量に関する情報を画面上で操作者に選択させて設定する運動条件設定手段と、前記運動条件設定手段で設定された第1の粒子群中の粒子の発生期間および粒子の量に関する情報に基づいて、シミュレーション中の指定された期間に、前記設定された粒子の量を発生させて粒子の運動の計算処理を行う分子運動計算手段とを設けることで解決される。

また、上記の粒子の初期位置の設定をより汎用的にするという課題については、第1の粒子群と第2の粒子群とから構成される粒子の運動をシミュレーションするために、前記第1の粒子群の粒子の発生位置を領域として、画面上で操作者に指定させて設定する運動条件設定手段と、前記運動条件設定手段で設定された領域より、第1の粒子群の粒子の発生させて、粒子の運動の計算処理を行う分

子運動計算手段とを設けることで解決される。

【0006】

さらに、設定した値とシミュレーション全体との関係を、操作者に理解しやすくするという課題については、粒子の運動の計算処理を行い当該粒子における現象をシミュレートする分子運動計算手段に入力される粒子の運動条件を、画面を通して操作者に設定させる、運動条件設定手段と、前記運動条件設定手段で設定した条件に基づいて、粒子の運動の初期状態を示す図を画面に表示する初期運動状態図表示手段とを設けることで解決される。

【0007】

【発明の実施の形態】

図1は本発明のシステム構成図を示す図である。1は処理装置、2は表示装置、10は粒子シミュレーションの対象を設定する設定手段であり、設定手段10は、粒子の運動条件を設定する運動条件設定手段11と運動条件設定手段11で設定した内容を表示装置2にグラフィック表示する初期運動状態図表示手段12より構成される。20は粒子の運動を時系列に計算していく分子運動計算手段20であり、上記運動条件設定手段11で設定した内容に基づいて、粒子を発生させる粒子発生手段21と、計算対象の粒子（原子または分子）の相互作用を計算する分子動力学計算手段22より構成される。31は粒子運動計算手段で求めた粒子の運動を、表示装置2に表示するシミュレーション表示手段である。

【0008】

51、52、53はそれぞれ分子構造DB、結晶構造DB、分子性結晶DBであり、操作者はこれらのDBからシミュレーションの対象となる粒子を前記運動条件設定手段11を用いて選択する。これらのDBには、分子や結晶の原子構成情報が記憶されており、分子動力学計算手段22は、選択された粒子に対応する原子構成情報を用いて粒子の運動を計算する。60は粒子（原子または分子）間の相互作用（ポテンシャル）を計算するためのプログラムの集合であるポテンシャルライブラリである。選択された粒子間でどの相互作用（例えば、ファンデルワールス力、クーロン力等）を考慮するかを操作者に指定させ、分子動力学計算手段22が、その指定内容に従い、このポテンシャルライブラリより該当する

相互作用を求めるプログラムを用いて、粒子間の運動を計算する。

【0009】

7は、前記設定手段11で設定した運動条件を記憶しておく、運動条件記憶部であり、粒子運動計算手段20は、運動条件記憶部7の内容に基づいて、粒子の運動を計算する。4は粒子運動計算手段20が計算した結果を時系列に記憶する時系列記憶部であり、シミュレーション表示手段31は時系列記憶部4の内容を時系列に、表示装置2にグラフィック表示をする。操作者は表示装置2に表示されたグラフィック表示により、粒子のシミュレーション結果を観察する。

【0010】

図2は、本願発明におけるシステムの全体の流れ、すなわち、シミュレーション対象の設定から粒子の運動の計算およびその計算結果の出力までのフローを示す図である。

この実施例においては、シミュレーション対象の粒子は、成膜等の、外から観察すると静止している（分子レベルでは分子運動を多少している）粒子群である基盤粒子と、成膜等の静止している粒子群に衝突する粒子群である吸着子（吸着粒子）とより構成されている。

【0011】

まず、シミュレーション対象の設定については、設定手段10の運動条件設定手段11が、操作者にシミュレーション対象の粒子（基盤粒子と吸着子）に関する種々の設定を行わせ（S100）、設定手段10の初期運動状態図表示手段12が、操作者が設定した内容を表示装置にグラフィック表示する（S200）。すべての設定が終わると（S300）、設定手段10が設定した内容を運動条件記憶部7に記憶する。S100では、吸着子はいつ、どの位置からどの方向にどのくらいの速度を持って発生するか、基盤粒子はどのような属性であるか等の設定が行われ、S200で、各粒子の状態が図として表示されるので、操作者は自分が設定した内容の、シミュレーション対象の全体における意味（影響）を確認することができる。また、S100では、吸着子および基盤粒子として、具体的にどの物質を用いるかの設定も行わせる（設定画面は図示していない）。これは、図1に示した分子構造DB51、結晶構造DB52、分子性結晶DB53の中

から、操作者に選択指定させるものである。

#### 【0012】

S400は、シミュレーションの初期処理であり、設定された基盤粒子の情報に基づいて、基盤粒子データが作成される。基盤粒子は吸着子と異なり、初期の粒子数と時間経過後の粒子数が同じであるため、シミュレーションの開始前に作成する。また、同時に吸着子について、いつどの粒子を発生させるかを示すデータを作成する。

これ以降は時間経過毎に順次処理を行うシミュレーションの処理であり、まず、現時点において発生させるべき吸着子のデータがあるか判定し（S410）、あれば該当する吸着子を発生させる（S420）。発生させた吸着子と基盤粒子とについて、分子動力学計算を行う（S500）。分子動力学計算の結果をファイル出力する（S510）。そして時間を進め、終了時間になったかを判定し（S520）、終了時間になっていれば、シミュレーションのための分子動力学計算を止める。その後、操作者の指示に基づいて、シミュレーションの結果をグラフィック表示する（S600）。すなわち、先の分子動力学計算の結果を格納したファイルには時系列に各粒子の状態（座標等）が格納されており、その情報に基づいて、グラフィック表示する。

#### 【0013】

図3は、吸着子および基盤粒子の設定のうち、吸着子発生源設定および基盤粒子属性設定の処理フローを示すものである。なお、基盤粒子は、位置を移動しない固定粒子と、温度が一定の温度制御粒子と、位置の移動の制限も温度の変化の制限もない自由粒子とがある。図7の設定画面は、吸着子発生源（Source

Emission Plane）の設定画面710と、基盤粒子の温度制御粒子（Head Bath Component）の設定画面720と、基盤粒子の固定粒子（Fixed Component）の設定画面730と、吸着子と基盤粒子の設定情報の関係をグラフィック表示する画面750と、グラフィック表示画面750の視点方向を変更するための画面（Viewing）760より構成されている。

#### 【0014】

グラフィック表示画面750のうち、751は吸着子発生源の領域を示したものであり、752は吸着子が吸着子発生源751から最大どのくらいの角度で初速度を与えられて発生するかを示す図である。753、754は基盤粒子の属性の範囲を示す図であり、753は基盤粒子の固定粒子の範囲を示し、753は基盤粒子の温度制御粒子の範囲を示している。これらは、操作者が設定画面を通して設定した内容を、設定手段10の初期運動状態図表示手段12が表示するものである。

#### 【0015】

吸着子発生源、基盤粒子の温度制御粒子、基盤粒子の固定粒子の各々の設定画面(710、720、730)では、スライダと呼ばれる四角のマークを、操作者がマウスを用いて左右に移動させることにより、その値を設定するもの(または「+」ボタンと「-」ボタン)と、直接、表示されている数値の位置を操作者がマウスでクリックし、数字キーで入力するものの、2通りの入力方法がある。

図3は、その設定入力の処理を示したものであり、S110、S120、S130は各々の設定画面のスライダが操作されたかを判定するステップであり、S140は操作者が数値キーを用いて数値入力をした後に、反映のボタン(図7では「Apply」ボタン)が押されたかを判定するステップである。各々の設定画面のスライダが操作された場合には、各々の該当する設定処理が起動される。

また、S140の「Apply」ボタンが押された場合には、3つの設定処理(吸着子発生源の設定処理、温度制御粒子の設定処理、固定粒子の設定処理)が起動される。S300は設定終了ボタン(図7では「OK」ボタン)が押されたかを判定するステップである。設定終了ボタンが押されると、設定内容をファイル(図1の運動条件記憶部7、図15の運動条件設定ファイル7)に記憶する。

図4、図5、図6はそれぞれの吸着子発生源の設定処理、温度制御粒子の設定処理、固定粒子の設定処理のフローを示したものである。

#### 【0016】

まず、図4の吸着子発生源の設定処理について説明する。操作者は吸着子の発生源を領域として指定する。これは、各吸着子毎にその発生源の位置を設定する代わりに、複数の吸着子について一度に設定できるようにしたものである。各吸

着子の実際の発生源については、後で詳述するが、乱数を用いて、指定された領域内の点が決定される。吸着子の発生領域は、X座標としての範囲と、Y座標としての範囲およびZ座標値として操作者に指定させる。グラフィック表示画面750の左下の位置が座標の原点である。スライダが操作された時はそのスライダの位置に基づいて、設定すべき数値を算出する(S211)。また、「+」ボタン、「-」ボタンが押された時は、その押された回数及び時間に基づいて、数値を増減する(S212)。新たに算出したX座標の範囲、Y座標の範囲、Z座標値に基づいて、図7のグラフィック表示画面の751の図を再表示する。

## 【0017】

基盤粒子の設定については、図5と図6を用いて説明する。前述したように基盤粒子は、位置を移動しない固定粒子と、温度が一定の温度制御粒子と、位置の移動の制限も温度の変化の制限もない自由粒子とがある。本粒子シミュレーションシステムでは、固定粒子の領域の設定については、温度制御粒子と自由粒子とを合わせた領域を操作者に設定させ、それ以外の部分を固定粒子として設定している。また、温度制御粒子については、先に設定した温度制御粒子と自由粒子とを合わせた領域のうち、温度制御粒子と自由粒子の境界を操作者に指定させて、各々の粒子の設定を行っている。

## 【0018】

前述したように、図6は固定粒子の設定処理フローであるが、操作者が指定する領域は、温度制御粒子と自由粒子とを合わせた領域であり、設定手段10が、基盤粒子全体の領域から指定された領域を除いた領域を固定粒子の領域とし、固定粒子に該当する各粒子の座標値を算出する。固定粒子の設定処理フローを順次説明すると、まず、操作者に固定粒子を設定するための直方体または平行六面体(固定粒子および温度制御粒子を含む領域)の頂点である座標を、図7の設定画面の730の内のスライダおよび数値により、X座標の範囲およびY座標の範囲およびZ座標の下限值を入力させる(S231)。(図では、直方体であるが、基盤粒子が結晶である場合には、結晶独自の座標系が結晶構造DB52に格納されており、その座標系を使用した場合には、座標軸が直交しないために平行六面体となる。)すると、本システムの初期運動状態図表示手段12が、固定粒子を

設定するための領域（温度制御粒子と自由粒子を合わせた領域）を直方体または平行六面体として表示する（S 2 3 2）。同時に固定粒子に対応する粒子をその属性（固定粒子）に対応する態様（色等）で表示する。操作者が設定したこの内容に基づいて、固定粒子の各粒子の座標を算出し、当該座標値に対応する粒子の属性を固定粒子に設定する（S 2 3 3）。この設定内容は、本粒子シミュレーションに用いる粒子の属性を管理するファイル（またはテーブル）に格納される。このファイルは、図 1 5 の運動条件設定ファイル 7 である。運動条件設定ファイル 7 には、基盤粒子以外に吸着粒子の設定情報も格納している。

#### 【0 0 1 9】

基盤粒子に関する情報は 8 6、8 7、8 8 のカラムが該当する。8 6 は基盤を構成する原子の数であり、この例では 5 0 0 個である。8 7 は基盤を構成する各原子の座標値が格納されている。この例では原子が 5 0 0 個あるため、5 0 0 個の座標値を格納している。8 8 は、8 7 の座標値で特定される各原子の属性を格納しており、各原子がどのような運動属性を持っているかを格納している。

「0」は自由運動をする原子、「1」は他の原子の影響によって温度が変化しない原子（温度一定の原子）、「2」は他の原子の影響によって動作しない（静止している）原子を示している。

#### 【0 0 2 0】

図 5 は、温度制御粒子設定の処理フローである。図 7 の 7 2 0 の設定画面は、操作者に、上記の固定粒子設定処理で指定した領域すなわち温度制御粒子と自由粒子の境界を指定させるものである。操作者により、図 7 の 7 2 0 の設定画面を通して、スライダまたは数値入力により温度制御粒子と自由粒子の境界の Z 座標値が指定されると、上記の固定粒子設定処理で指定した領域すなわち温度制御粒子と自由粒子を合わせた領域の下限の Z 座標値より、今回指定された Z 座標値までの範囲が、温度制御粒子となる。そして、図 7 の 7 5 0 の表示画面に表示されている基盤粒子全体の底面の 4 つ頂点と Z 座標により、温度制御粒子とその上側との境の面を構成する 4 つの座標を算出する（S 2 2 1）。算出した 4 つの座標に基づいて、温度制御粒子の境の面の表示を行う（S 2 2 2）。同時に温度制御粒子に対応する粒子、および、自由粒子に対応する粒子を、それぞれの属性に対

応する態様（色等で他の属性を識別可能な態様）で表示する。そして、固定粒子の場合と同様に、温度制御粒子の領域の粒子については、温度制御粒子であることの属性を、自由粒子の領域の粒子については、自由粒子であることの属性を、図7の運動条件設定ファイル7に格納する。（S223）。

#### 【0021】

すなわち、S223では、操作者が画面上で指定した範囲の粒子について、操作者が指定した座標範囲に含まれる粒子を求め、図15の運動条件設定ファイル7の対応する粒子の属性値を「1」（温度制御）に設定する。

また、図7の760の設定画面は、750の表示画面に表示されるグラフィックの図形を視点方向を指定するものであり、X軸、Y軸、Z軸の回りに何度回転させて表示するかを指定させるものである。

#### 【0022】

図8は、吸着粒子の発生スケジュールの設定画面である。800の設定画面では吸着粒子の種類をリストしており、現画面では1番の「n-pentane」が選択されている。810の領域は、シミュレーションを行う総ステップ数を表示するところであり、820はシミュレーションを行う総時間を何ピコ秒とするかを表示するところであり、これらの値は別の画面を設定されるものであり、吸着子の種類のより変化しないものである。また、830は、吸着子毎に設定するものであり、発生の間隔を均等（Equal）にするか、ランダム（Random）にするかを指定するところである。840および850では、各指定されたステップ数（840）までの間に何個（850）を発生させるかを指定するところである。この例では、1～5000ステップの間に5個の粒子を発生させ、5001から10001までの間に発生させる粒子数は0個であることを示している。ここで設定した内容は、図15の運動条件設定ファイル7に格納される。運動条件設定ファイル7の71から83までのカラムは吸着子（吸着粒子と同じ）の種類毎にデータを格納しており、前記の設定の内容のうち、830は発生の間隔を均等（Equal）にするか、ランダム（Random）にするかの指定は、77のカラムにそれぞれの粒子について格納される。840および850で設定した指定されたステップ数（840）までの間に何個（850）を発生させ

るかの情報は、79および80のカラムに格納される。

#### 【0023】

図9は、吸着子の物理状態設定画面である。760は吸着子の種類をリストしたものであり、770、790は760のリスト中より選択された吸着子毎にその発生時の物理状態を設定するものである。770では初期の温度を設定するものである。初期の温度と速度との間には、

$$1/2 * M * V^2 = 3/2 * K_b * T$$

(M:質量、V:速度、K<sub>b</sub>:ボルツマン定数、T:温度)

という関係があり、この設定された温度より、吸着子の発生速度を算出する。

#### 【0024】

790の「All」「None」は、個々の吸着子が発生する際に、吸着子を構成する個々の原子に速度を与えるかまたは否かを選択指定させるものであり、「Orientation..」は、個々の吸着子が発生する際の吸着子の向きを指定する否かを選択指定させるものであり、選択した場合には、吸着子の向きの設定する画面、図10が表示される。また、「Direction..」は個々の吸着子が発生する際の吸着子の発生方向（吸着子の重心の速度方向）を指定するか否かを選択指定させるものであり、選択した場合には、吸着子の発生方向を設定する画面が図11が表示される。

#### 【0025】

「All」と「None」の設定で、「All」を設定した場合には、図15の運動条件設定ファイル7の74カラムに、静止しないを意味する「0」が格納され、「None」を設定した場合には、静止するを意味する「1」が格納される。

「Orientation..」を選択した場合には、図10の吸着子の方向（向き）の設定画面が表示され、操作者は、870の表示画面に表示されている吸着子の分子構造を見ながら、その向きを設定する。設定は、880の設定画面で、X軸、Y軸、Z軸の回りに何度回転させるかを指定することで行う。ここで設定した値も、運動条件設定ファイル7に格納される。（図15には図示せず）

但し、上記の「All」「None」の選択で、ここの原子に速度を与える

という「All」の選択をした場合には、「Orientation」の指定はできない。「Orientation..」を選択しない場合には、分子DB51等に格納されている向きが計算に使用される。

#### 【0026】

「Direction..」を選択した場合には、図11の設定画面が表示され、この画面には、一つの方角だけを指定する「Fix」という選択項目と、方角を範囲で指定し、その範囲内でランダムに発生することを指定する「Random」の選択項目がある。「Fix」が指定された場合には、その方角を指定させ、その結果を図7の750の表示画面の752のように方角を表示する。（但し、図7の752の表示は、「Random」を指定した場合のものである。）

「Random」が指定された場合には、図12のの設定画面が表示される。図12の900の表示画面に表示されている円錐の広がり範囲内で、吸着子が発生することを示している。図12の910の設定画面では、円錐の形状（広がり）、向きを指定するものである。広がりは $\phi$ で設定し、向きについては、円錐の軸の傾きをZ軸とのなす角度 $\theta$ および、X軸とのなす角度を $\phi$ で設定する。この設定内容に基づいて、図12の表示画面900を表示する。表示画面900の画面の下部は基盤粒子が存在するところである。また、この設定の後で、図7の設定画面を表示すると、図12で設定した吸着子が発生する可能性のある方角 $\phi$ （広がり）に基づいて、752の図の表示を行う。

#### 【0027】

そして、ここで設定された $\theta$ 、 $\phi$ 、 $\psi$ を、運動条件設定ファイル7のそれぞれ81、82、83のカラムに格納する。

図13は分子運動計算の処理フローであるが、図2の設定から実行までの処理フローのうち、S400以降に該当するものである。まず、分子運動計算処理に必要な運動条件設定ファイル7を読み込む（S401）。次に、読み込んだ運動条件設定ファイル7の、吸着子の発生期間および量に関する情報から、吸着子発生ステップおよび吸着子識別番号を格納したテーブルを作成する。作成するテーブルの構成は、図16のとおりである。例えば、図15の「3」の識別子を持つ

吸着子について説明する。72のカラムには吸着子の識別番号が格納されている。識別子「3」は、72のカラムの一番右端に格納されており、識別子「3」の吸着子に関する情報はすべてのカラムについて一番右端に格納されていることを示している。吸着子の発生期間の情報は79のカラムに格納されており、吸着子の発生量は80のカラムに格納されている。これらのデータは、1～1000ステップまでの間に1個の吸着子が発生し、1000～2000ステップまでの間に2個の吸着子が発生し、2000ステップからは吸着子が発生しないことを示している。また、77のカラムにはどのように発生するかの情報が格納されており、識別子「3」の吸着子は不等間隔で発生することが設定されている。

#### 【0028】

等間隔で発生する場合には、例えば、1000～2000ステップまでの1000ステップの間を発生個数2で割ることで、吸着子1個の発生間隔を求める（この場合は、500ステップ間隔となる）。また、不等間隔の場合には、乱数を発生させ、発生した乱数を1000から2000ステップまでの間隔1000ステップで割った余りを1000に加えることで粒子を発生すべきステップを求める。この計算を発生粒子数分行う。図16は、このようにして求めた結果の発生時期（ステップ番号）が格納されている。図16は1222ステップと1606ステップに識別子「3」の吸着子を発生することを示している。

#### 【0029】

図13の分子運動計算処理フローのS410以降は実際のシミュレーションの時間（ステップ数のカウント）がスタートした後のものである。まず、図16の吸着子発生テーブルを参照して、現在の時間が吸着子発生ステップとして定義されているかを判定する。該当するものがあれば、吸着子を発生させる。そして、発生した吸着子および先に生成した基盤粒子の各粒子間に働く力を計算する（S501）。各粒子間で働く力より、運動方程式の数値積分を用いて、各粒子の現在の座標および速度を算出する（S502）。そして、求めた結果を時系列データ（時系列に並べてあるデータ）として、時系列記憶部4に格納する。そして、次のステップが最終ステップかを判定し、そうでなければ、S410からの処理を繰り返す（S520）。

【0030】

図14は、吸着粒子発生処理フローであり、図13のS420の処理を詳細に示したものである。まず、乱数を用いて粒子の発生源位置を算出する。運動条件設定ファイル7の84、85カラムには、吸着子が発生する箇所が領域として定義されている。位置の算出は、領域内の座標値を乱数を2度発生することが算出する。すなわち、乱数を発生させ、X方向の領域の長さで割った時の余りをX方向の位置とし、続いてもう一度乱数を発生させ、Y方向の領域の長さで割った時の余りをY方向の位置とする。

【0031】

次に、粒子を構成する原子を粒子の重心に対して静止させるか否かを判定する(S422)。これは、まず、吸着子発生テーブルを参照して、発生すべき吸着子の識別子を求め、この吸着子の識別子をキーにして、運動条件設定ファイル7の74のカラムを参照する。74のカラムに「1」が格納させられていれば、個々の原子に速度を与える必要がないので、次のステップS425を行う。74のカラムに「0」が格納させられていれば、個々の原子に速度を与えるための処理を行う。

【0032】

個々の原子に速度を与えるための処理の前にまず、粒子の向きを決定する。これは、粒子の向き( $\theta$ 、 $\phi$ 、 $\psi$ )で乱数を発生させてランダムな向きになるように決定する(S423)。次に、粒子を構成する原子に初速度を設定する(S424)。粒子を構成する原子に初速度を与えるが、粒子全体としては重心がまず静止している状態を考え、以下の条件に基づいて各原子の仮の初速度を算出する。

—原子の運動量の総和がゼロであること ( $\sum M_i * V_i = 0$ )

—温度と速度の関係式

$$(\sum 1/2 * M_i * V_i^2 = (3N-3) / 2 * K_b * T$$

( $M_i$  : 原子の質量、 $V_i$  : 原子の速度、 $N$  : 粒子を構成する原子数

$K_b$  : ボルツマン定数、 $T$  : 粒子の初期温度)

(上記の  $(3N-3)$  は粒子の並進の自由度3を引いたものである。)

まず、温度と速度の関係式より、原子数N個の内の、 $N/2$ 個の各原子の初速度のx、y、z成分を $\theta$ 、 $\phi$ を所定範囲( $0 \leq \theta \leq 2\pi$ 、 $0 \leq \phi \leq \pi$ )で一様乱数を発生させて、以下の式により算出する。(但し、原子数Nが偶数で無い場合には、 $(N-1)/2$ について行い、一つの原子は例えば速度ゼロとする)

$$V_{ix} = ((3N-3) / \sum (1/M_i) * K_b * T)^{(1/2)} \\ * 1/M_i * \sin \theta * \cos \phi \\ = \alpha * \sin \theta * \cos \phi$$

$$V_{iy} = \alpha * 1/M_i * \sin \theta * \cos \phi$$

$$V_{iz} = \alpha * 1/M_i * \cos \theta$$

次に、原子の運動量の総和がゼロであることより、先に求めた1つの原子の運動量との和がゼロになるような1つの原子の速度を以下の式より算出する。(この計算を $N/2$ 個分行う)

$$V_{jx} = -M_i / M_j * V_{ix}$$

$$V_{jy} = -M_i / M_j * V_{iy}$$

$$V_{jz} = -M_i / M_j * V_{iz}$$

S425では、乱数を求めて、粒子の重心速度の方向を、その方向とZ軸のなす角が、 $0 \sim \phi$ 度の範囲で設定する。そして、この求めた粒子の重心速度の方向を、Z軸を回転軸として $\phi$ 度回転し(S426)、さらに、上記回転操作で得られた座標系O-X' Y' Z'のX'軸を回転軸として $\theta$ 度回転する(S427)。求めた速度方向と粒子の重心速度に基づいて、粒子を構成する各原子の仮の初速度に加算する(S428)。

【0033】

なお、重心速度は、上記でも説明したように、

$$1/2 * M * V^2 = 3/2 * K_b * T$$

(M:質量、V:速度、 $K_b$ :ボルツマン定数、T:温度)

という関係式と、運動条件設定ファイル7に格納されている温度情報より算出する。質量Mについては、吸着子を選択した、分子構造DB51、結晶構造DB52、分子性結晶DB53のいずれかに格納されている情報を用いる。

【0034】

【発明の効果】

本発明により、同じような操作で、吸着、結晶成長、表面損傷など様々な現象を扱えるようになる。さらに、個々のシミュレーション対象における、設定または変更したパラメタ値の変更の大きさ（影響度）が操作者に理解しやすくなった。

【図面の簡単な説明】

【図1】

システム構成図

【図2】

設定から実行までの処理フロー

【図3】

吸着子発生源設定および基盤粒子属性設定処理フロー

【図4】

吸着子発生源の位置及び領域指定の処理フロー

【図5】

温度制御粒子設定の処理フロー

【図6】

固定粒子設定の処理フロー

【図7】

吸着子、基盤粒子設定画面

【図8】

吸着子発生スケジュール設定画面

【図9】

吸着子物理状態設定画面

【図10】

吸着子の方向設定画面

【図11】

吸着子射出方向設定画面（その1）

【図12】

吸着子射出方向設定画面（その2）

【図13】

分子運動計算処理フロー

【図14】

吸着子発生処理フロー

【図15】

運動条件設定ファイル

【図16】

吸着子発生テーブル

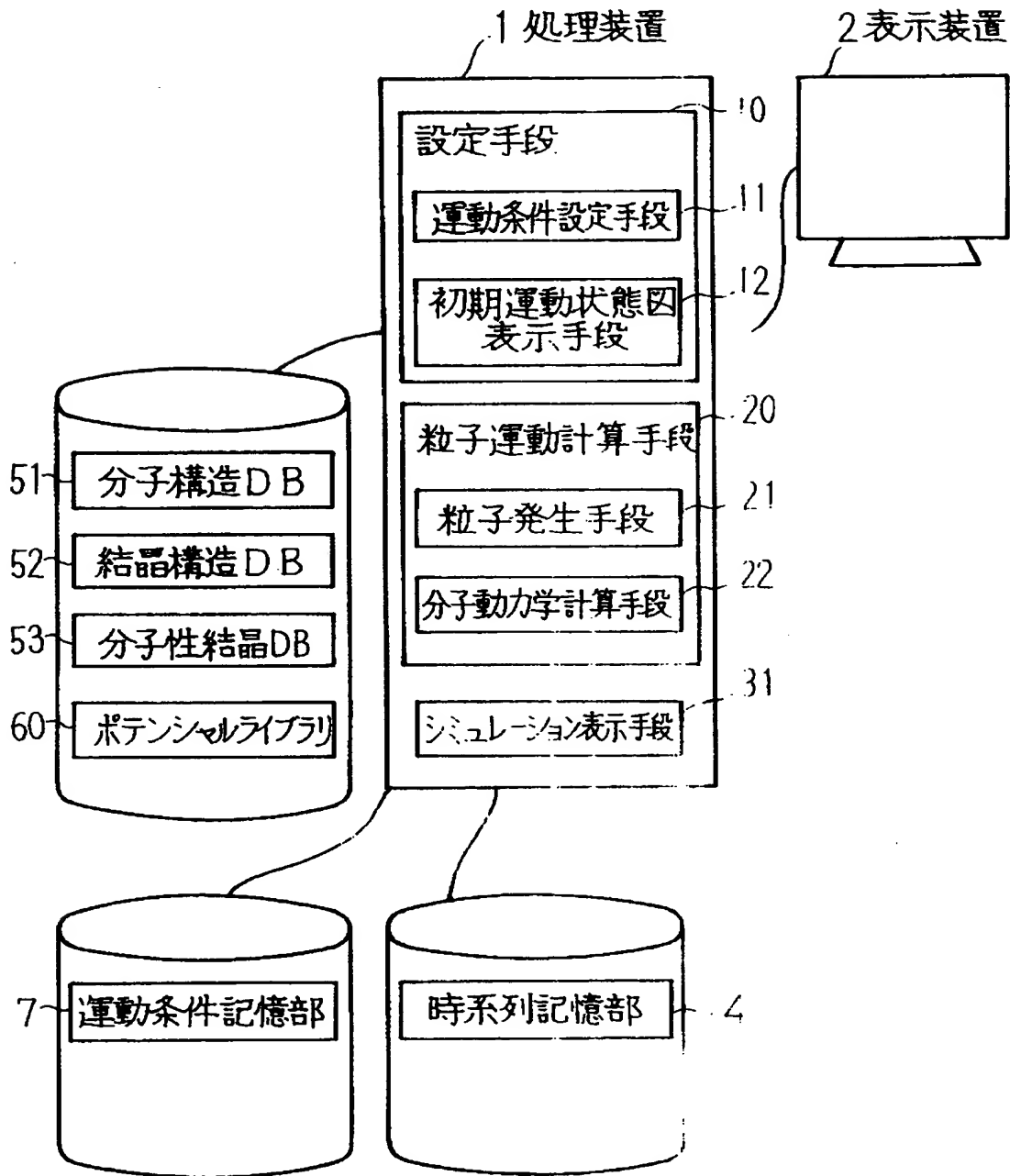
【符号の説明】

- |    |              |
|----|--------------|
| 1  | 処理装置         |
| 2  | 表示装置         |
| 4  | 時系列記憶部       |
| 7  | 運動条件記憶部      |
| 10 | 設定手段         |
| 11 | 運動条件設定手段     |
| 12 | 初期運動状態図表示手段  |
| 20 | 粒子運動計算手段     |
| 21 | 粒子発生手段       |
| 22 | 分子動力学計算手段    |
| 31 | シミュレーション表示手段 |
| 51 | 分子構造DB       |
| 52 | 結晶構造DB       |
| 53 | 分子性結晶DB      |
| 60 | ポテンシャルライブラリ  |

【書類名】 図面

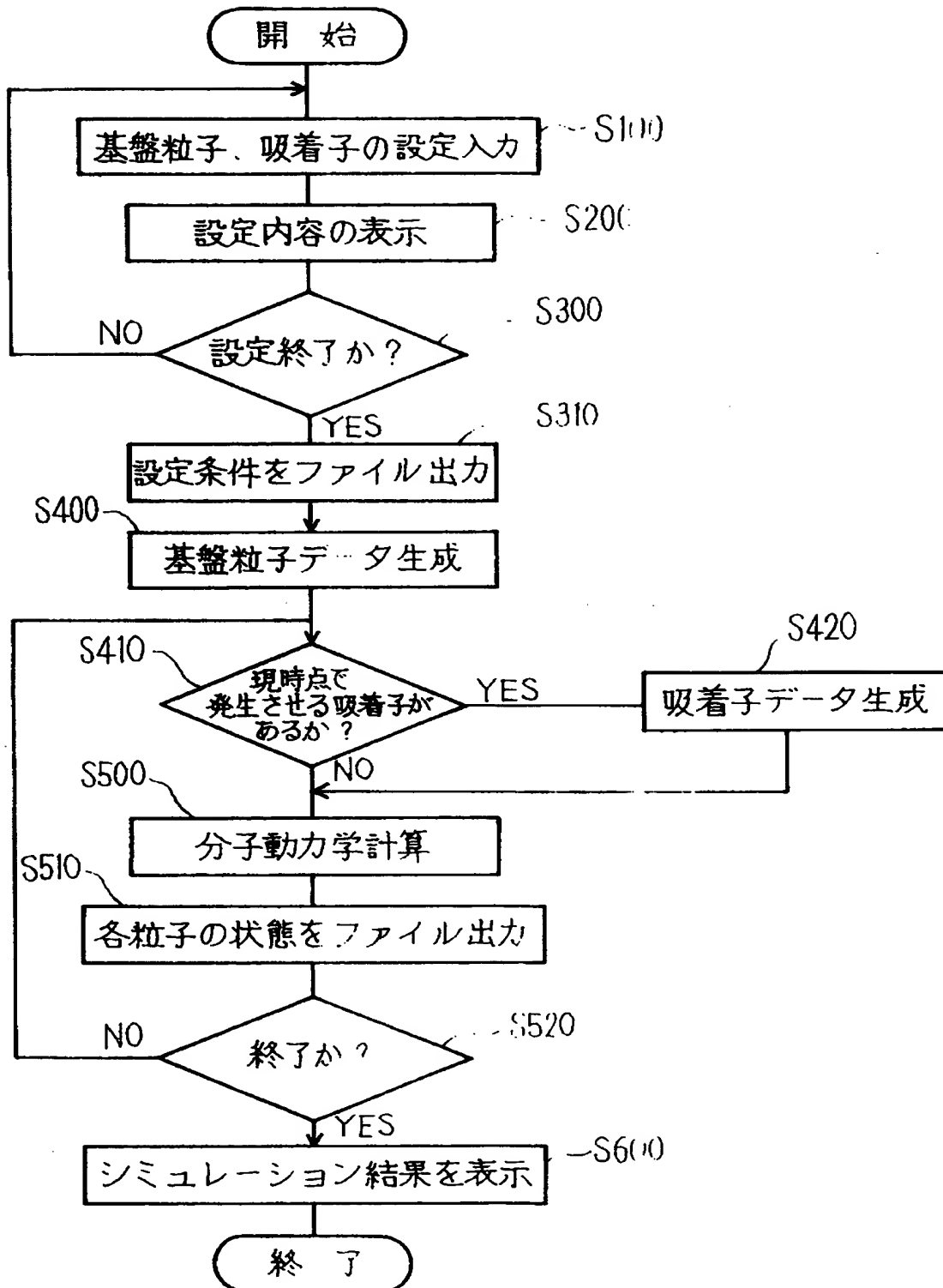
【図1】

システム構成図



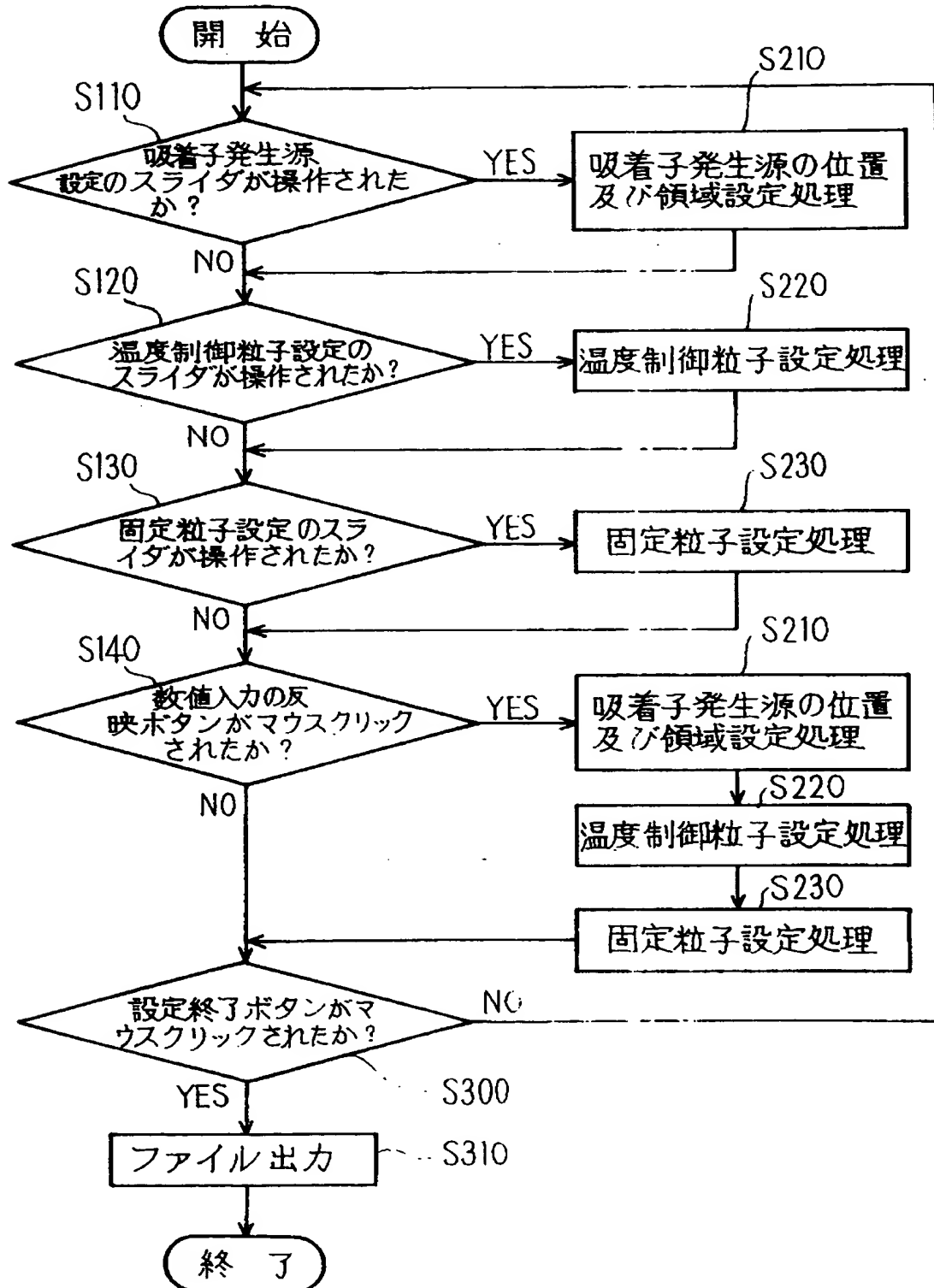
【図2】

設定から実行までの処理フロー



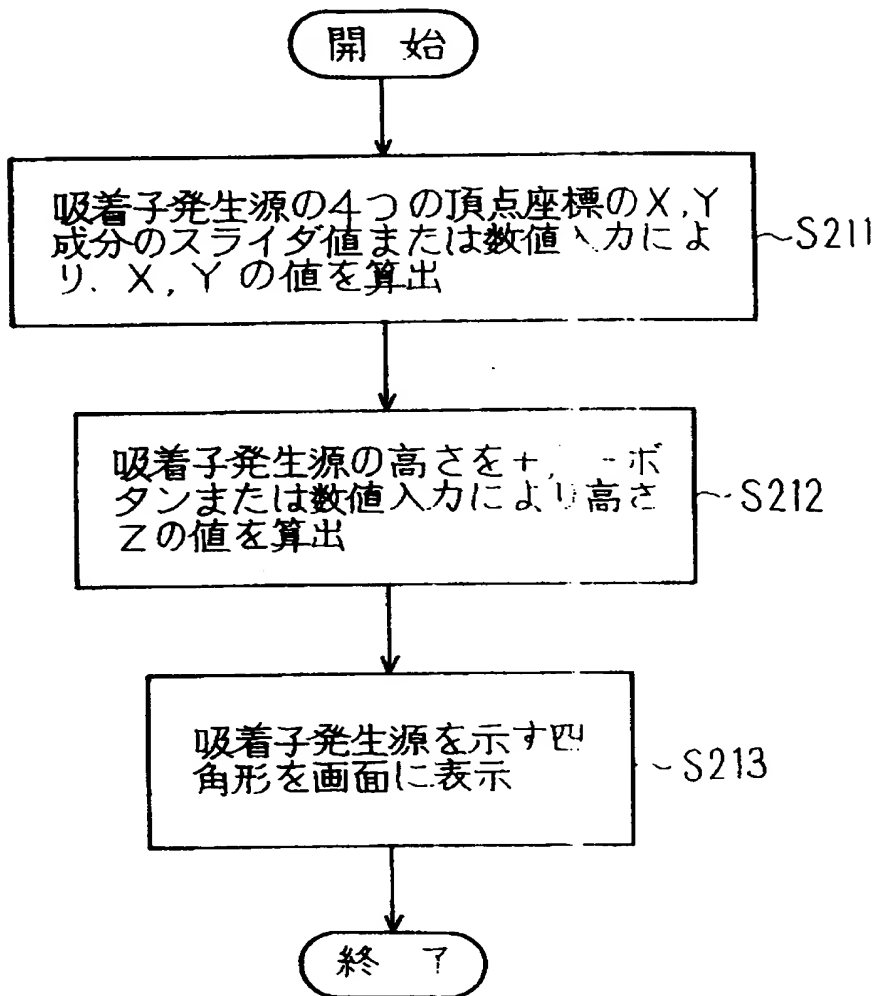
【図3】

吸着子発生源設定及び基盤粒子属性設定処理フロー



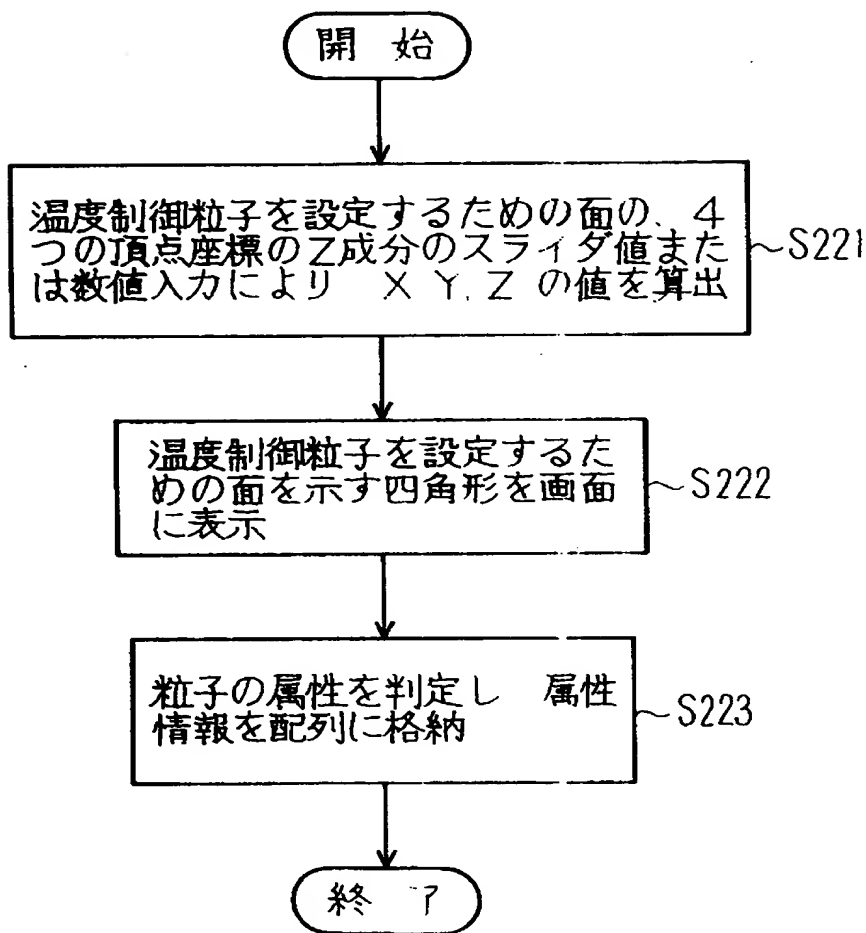
【図4】

吸着子発生源の位置及び領域指定の処理フロー



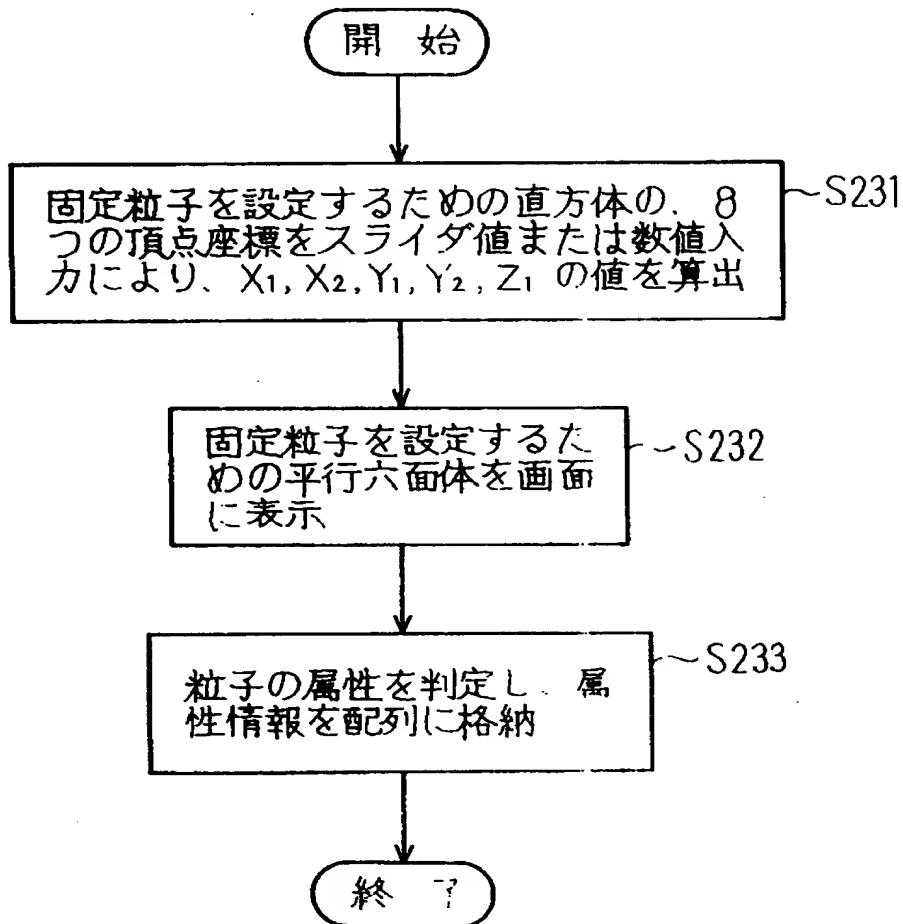
【図5】

温度制御粒子設定の処理



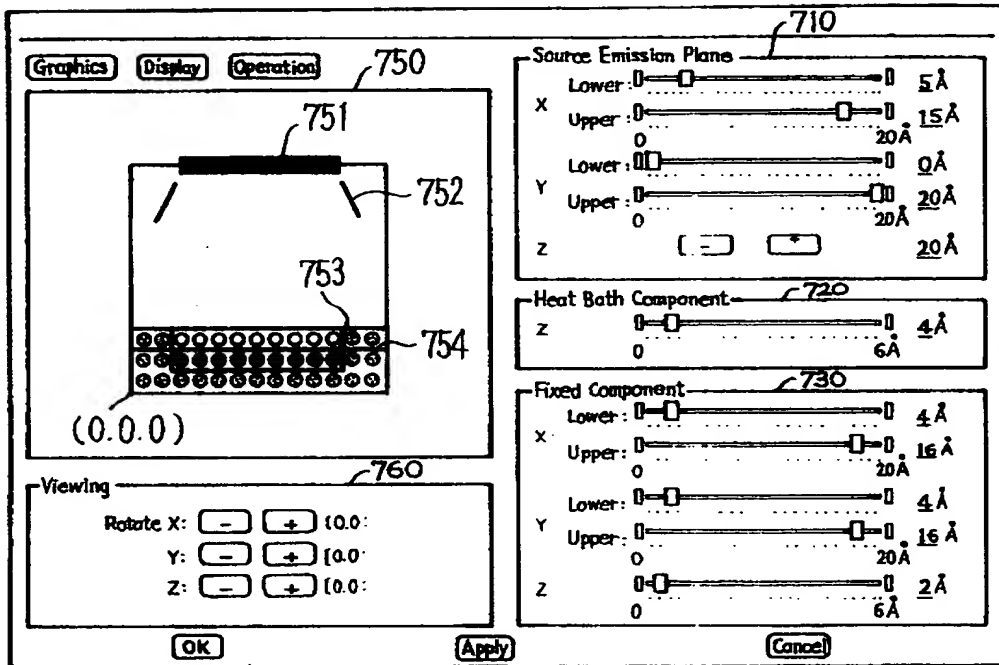
【図6】

固定粒子設定の処理フロー



【図7】

吸着子、基盤粒子設定画面



【図8】

吸着子発生スケジュール設定画面

Generation Schedule

| No. | Component        | Total Generative Number |
|-----|------------------|-------------------------|
| ◆ 1 | n-pentane        | 5                       |
| ◇ 2 | triphenylmethane | 5                       |
| ◇ 3 |                  |                         |
| ◇ 4 |                  |                         |

800

810 Simulating Step [Step] : 10001

820 Simulating Time [ps] : 10.001000

830 Generation Interval : ◆ Equal ◇ Random

Delete 840 850

| No. | Interval [Step] | Number | Average [Step] |
|-----|-----------------|--------|----------------|
| ◇ 1 | 5000            | 5      | 1000           |
| ◇ 2 | 5001            | 0      | None           |
| ◇ 3 |                 |        |                |
| ◇ 4 |                 |        |                |

OK Apply Cancel

【図9】

吸着子物理状態設定画面

Physical Condition

Source

| No. | Component        | Initial Temperature [K] |
|-----|------------------|-------------------------|
| ◆ 1 | n-pentane        | 300.0000                |
| ◇ 2 | triphenylmethane | 500.0000                |
| ◇ 3 |                  |                         |
| ◇ 4 |                  |                         |

Initial Temperature [K] : 300.0000

Component : ☒ Equal ☒ Maxwell

Internal Degree of Freedom : ☒ All ☒ None

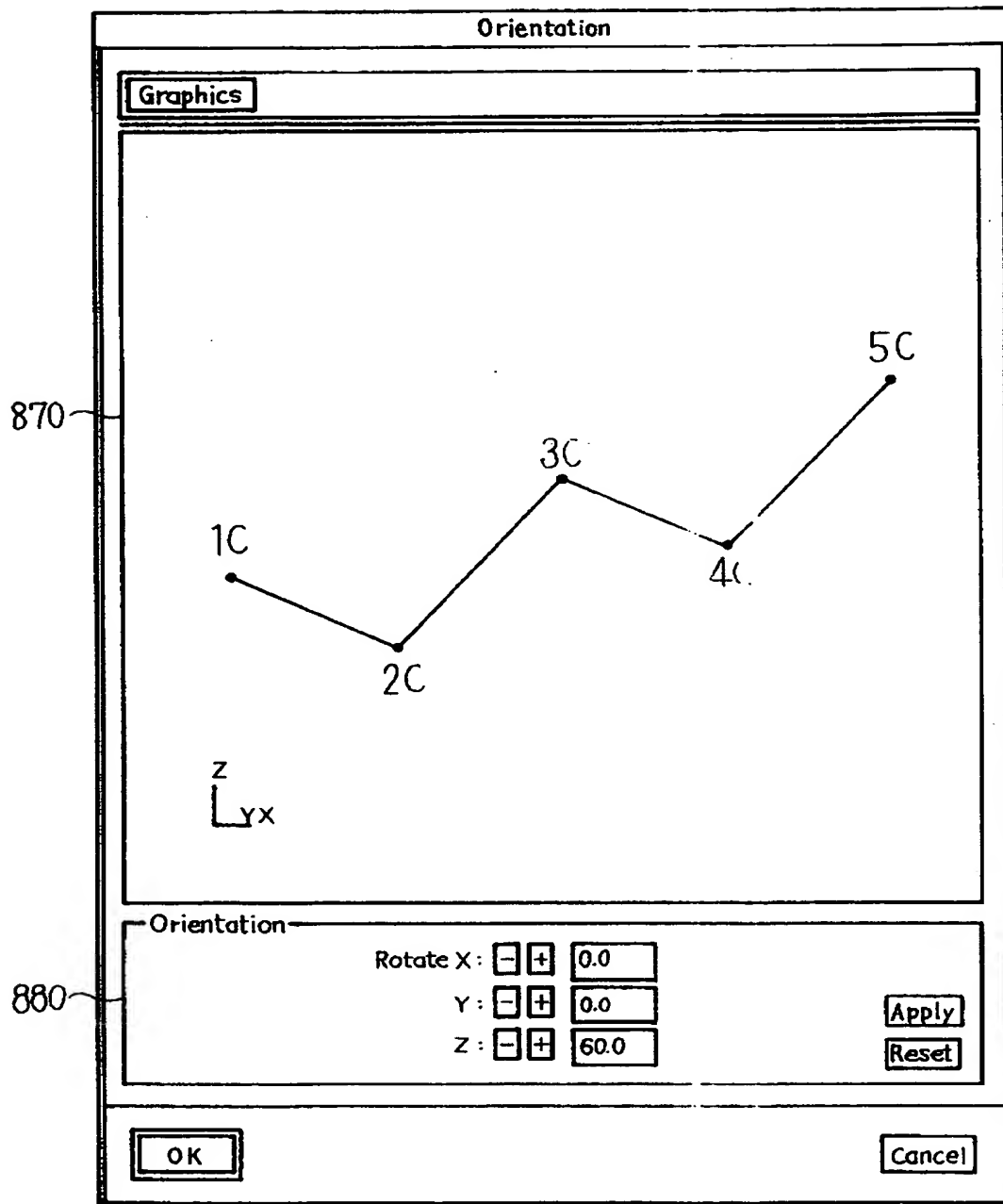
☐ Orientation

☐ Direction...

OK Apply Cancel

【図10】

吸着子の方向設定画面



【図 1 1】

吸着子射出方向設定画面（その 1）

860

—O Emission Direction - n-pentane

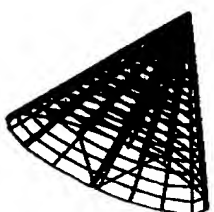
☒ Fix ☐ Random ☒ Direction

Apply

【図12】

吸着子射出方向設定画面（その2）

Direction



900  $\theta$  [deg]:

$\phi$  [deg]:

$\psi$  [deg]:

910 Orientation

Rotate X:

-

+

Y:

-

+

Z:

-

+

Apply

Reset

920 

OK

Apply

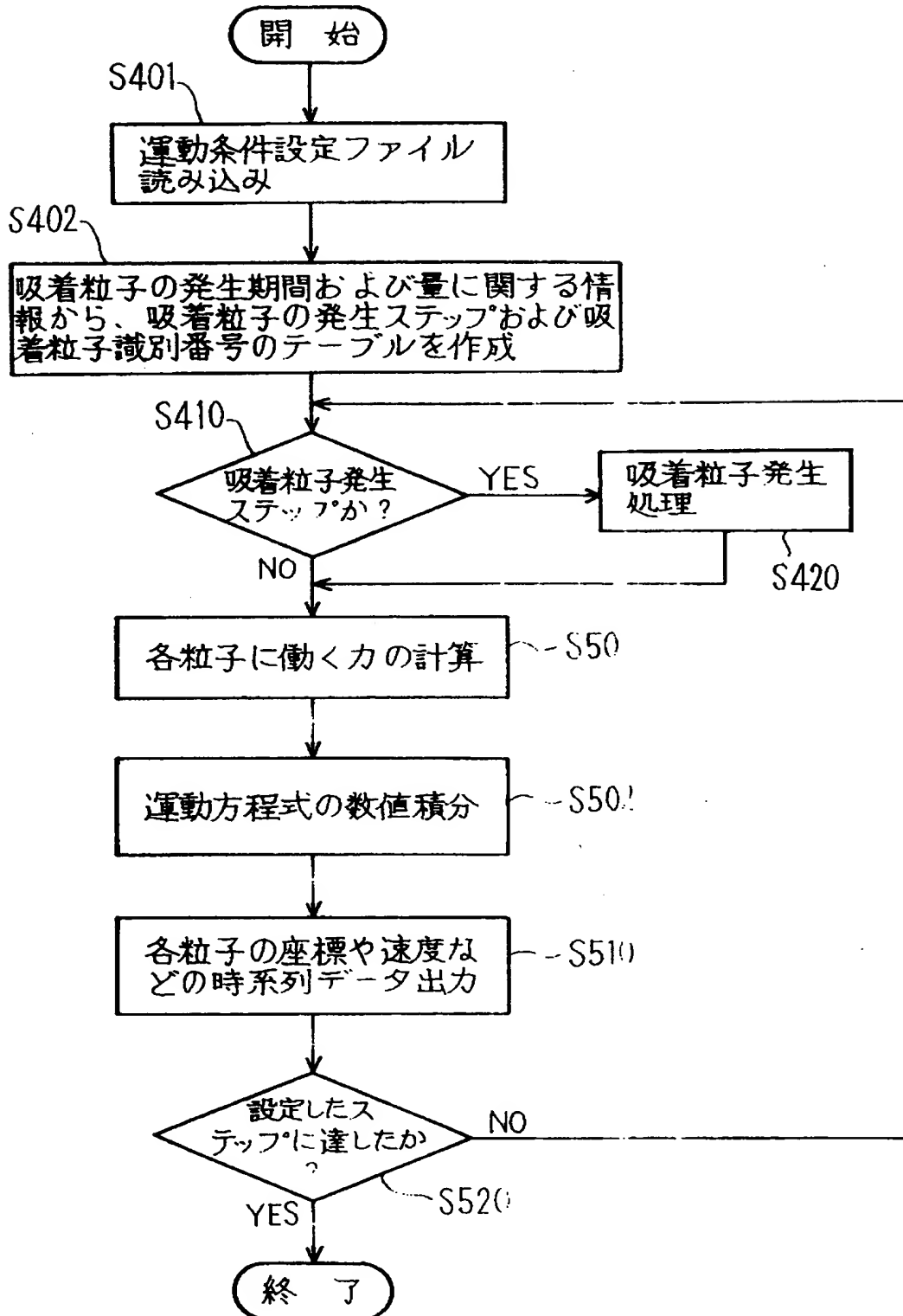
Cancel

12

出証特平09-3027368

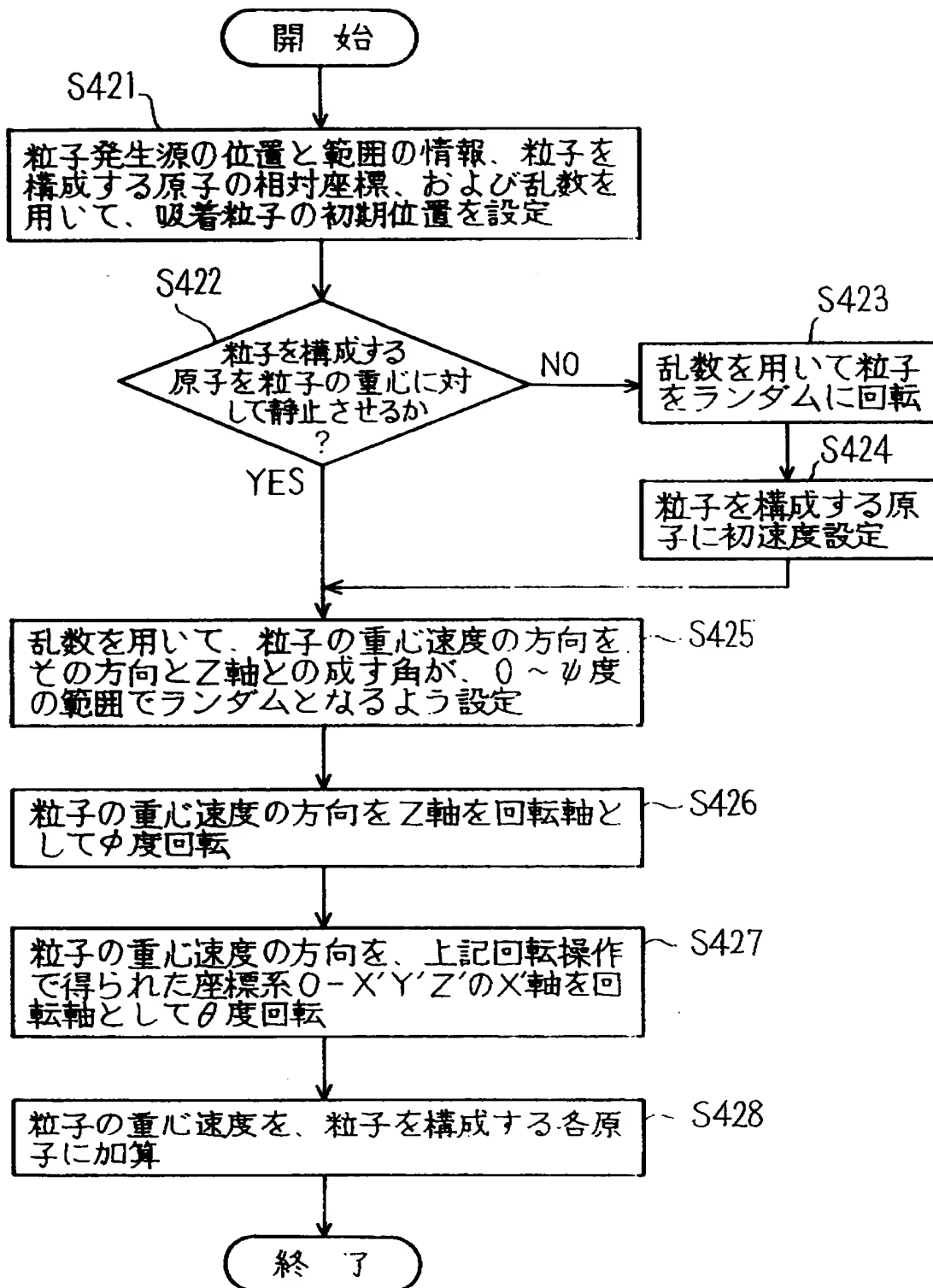
【図13】

分子運動計算処理フロ



【図14】

吸着粒子発生処理フロー



【図15】

## 運動条件設定ファイル

|     |                       |               |               |  |
|-----|-----------------------|---------------|---------------|--|
| 71~ | 3                     |               |               | 吸着粒子種数                                   |
| 72~ | 1                     | 2             | 3             | 吸着粒子の識別子                                 |
| 73~ | 100.0                 | 200.0         | 300.0         | 吸着粒子初期温度(K)                              |
| 74~ | 0                     | 1             | 0             | 粒子の重心に対し各原子を<br>0 静止しない<br>1 静止する        |
| 75~ | 10                    | 20            | 30            | 吸着粒子を構成する原子の数                            |
| 76~ | 1.0, ..., 5.0         | 1.0, ..., 5.0 | 1.5, ..., 5.5 | 吸着粒子を構成する原子のX座標値                         |
|     | 1.5, ..., 5.5         | 0.5, ..., 2.5 | 1.0, ..., 5.0 | Y座標値                                     |
|     | 0.5, ..., 2.5         | 1.5, ..., 5.5 | 0.5, ..., 2.5 | Z座標値                                     |
| 77~ | 1                     | 0             | 1             | 吸着粒子の発生間隔<br>0 等間隔<br>1 不等間隔             |
| 78~ | 1                     | 2             | 3             | 吸着粒子の発生期間数                               |
| 79~ | 1                     | 1, 1000       | 1, 1000, 2000 | 各吸着粒子の 各発生期間の<br>開始ステップ                  |
| 80~ | 0                     | 0.3           | 1, 2, 0       | 各吸着粒子の 各発生期間に<br>おける発生粒子数                |
| 81~ | 180.0                 | 150.0         | 120.0         | 粒子の射出方向 $\theta$                         |
| 82~ | 0.0                   | 120.0         | 240.0         | 粒子の射出方向 $\phi$                           |
| 83~ | 0.0                   | 30.0          | 10.0          | 粒子の射出方向の分布角 $\psi$                       |
| 84~ | 5.0                   | 0.0           | 20.0          | 粒子発生源の位置(X, Y, Z座標値)                     |
| 85~ | 10.0                  | 20.0          |               | 粒子発生源の大きさ(X, Y方向の長さ)                     |
| 86~ | 500                   |               |               | 基板原子数                                    |
| 87~ | 1.0, 2.0, ..., 20.0   |               |               | 基板を構成する原子のX座標値                           |
|     | 1.0, 2.0, ..., 20.0   |               |               | Y座標値                                     |
|     | 1.0, 2.0, ..., 6.0    |               |               | Z座標値                                     |
| 88~ | 0, 1, 2, ..., 2, 1, 0 |               |               | 基板を構成する原子の属性<br>0 自由運動<br>1 温度制御<br>2 静止 |

【図16】

吸着子発生テーブル

9

| 吸着子識別子 | ステップ番号 |
|--------|--------|
| 3      | 1222   |
| 3      | 1606   |

【書類名】 要約書

【要約】

【課題】本発明は、粒子の運動の設定をより汎用的にすることを課題とする。

【解決手段】本発明は、第1の粒子群と第2の粒子群とから構成される粒子の運動をシミュレーションするために、前記第1の粒子群の粒子の発生条件として、複数個の発生期間と粒子の量に関する情報を画面上で操作者に選択させて設定する運動条件設定手段と、前記運動条件設定手段で設定された第1の粒子群中の粒子の発生期間および粒子の量に関する情報に基づいて、シミュレーション中の指定された期間に、前記設定された粒子の量を発生させて粒子の運動の計算処理を行う分子運動計算手段とを備えるようにした。

【選択図】 図1

【書類名】 職権訂正データ  
【訂正書類】 特許願

<認定情報・付加情報>

【特許出願人】  
【識別番号】 000005223  
【住所又は居所】 神奈川県川崎市中原区上小田中4丁目1番1号  
【氏名又は名称】 富士通株式会社  
【代理人】 申請人  
【識別番号】 100072590  
【住所又は居所】 神奈川県川崎市中原区上小田中4丁目1番1号 富  
士通株式会社内  
【氏名又は名称】 井桁 貞一

出 願 人 履 歴 情 報

識別番号

[000005223]

|          |                       |
|----------|-----------------------|
| 1. 変更年月日 | 1996年 3月26日           |
| [変更理由]   | 住所変更                  |
| 住 所      | 神奈川県川崎市中原区上小田中4丁目1番1号 |
| 氏 名      | 富士通株式会社               |